

Для изучения влияния вакансий О на стабилизацию  $\text{of-Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$  рассчитаны фазовые диаграммы зависимости объёма элементарной ячейки от внешнего давления (рис. 1). Увеличение концентрации вакансий О приводит к тому, что диапазон давлений  $P$ , при которых структура  $\text{of-Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$  может существовать, сужается: структура претерпевает сильную трансформацию с изменением симметрии для 1 вакансии на 12 атомов при  $P > 4$  ГПа, для 1 вакансии на 24 атома – при  $P > 13$  ГПа, для вакансии на 36 атомов – при  $P > 15$  ГПа.  $\text{m-Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$  оказывается ещё более чувствителен к величине внешнего давления: давления фазового перехода составляют 3, 8, 10, 13 ГПа в расчётах вакансий в суперячейках 12, 24, 36 и 48 атомов, соответственно.

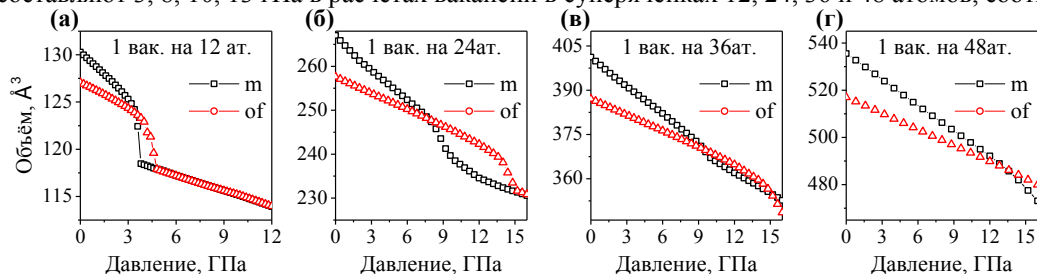


рис. 1. Зависимость объёма элементарных ячеек  $\text{m-}$  и  $\text{of-Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$  от величины внешнего давления.

Для любой концентрации вакансий О энтальпия  $\text{of-}$  фазы  $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$  не бывает меньше энтальпии  $\text{m-}$ ,  $\text{oI}$  и  $\text{oII}$  фаз (рис. 2). Вакансии О положительно сказываются на стабилизации  $\text{oII-Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ . Как и для бездефектных кристаллов,  $\text{of-Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$  является нестабильным для кристаллов с вакансиями кислорода при любой величине внешнего давления, при которой структура способна существовать. Таким образом, наличие вакансий О негативно сказывается на возможности стабилизации ферроэлектрической фазы. Данный результат согласуется с гипотезой, что деградация тестовых структур FRAM обусловлена генерацией вакансий О.

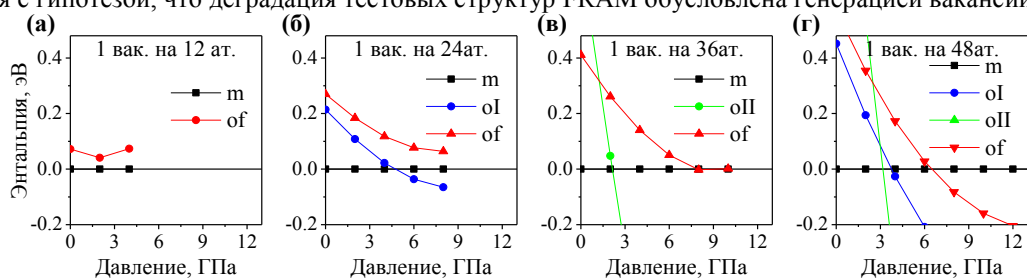


рис. 2. Энтальпия орторомбических фаз и  $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$  по отношению к энтальпии моноклинной фазы  $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ , рассчитанная для кристаллов с различной концентрации вакансий кислорода.

Список публикаций:

- [1] J. Müller, T.S. Böske, D. Bräuhäus, U. Schröder, U. Böttger, J. Sundqvist, P. Kücher, T. Mikolajick and L. Frey, *Appl. Phys. Lett.* 99, 112901 (2011).
- [2] F.P.G. Fengler, R. Nigon, P. Murali, E.D. Grimley, X. Sang, V. Sessi, R. Hentschel, J.M. LeBeau, T. Mikolajick and U. Schroeder, *Adv. Electron. Mater.* 4, 1700547 (2018).

## Влияние ион-селективных примесей на спектры импеданса жидких кристаллов

Петрова Кристина Павловна

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы

Хазимуллин Максим Вильевич, к.ф.-м.н.

[krispet98@gmail.com](mailto:krispet98@gmail.com)

Механизмы транспорта электрического заряда в органических соединениях являются предметом активного исследования современной физики конденсированного состояния. Жидкие кристаллы представляют собой органические жидкости с небольшой проводимостью, вызванной примесными ионами, содержание и свойства которых часто не известны. Метод импедансной спектроскопии позволяет получить количественные оценки параметров ионов (подвижность и концентрацию). Однако свойства положительных и отрицательных носителей зарядов стандартными средствами импеданс-спектроскопии различить не удастся. В данной работе для определения свойств ионов разного знака были выполнены измерения и анализ импеданс-спектров жидких кристаллов, допированных ион-селективными молекулами – макроциклическими полиэфирами (краун-эфирами), способными присоединять ионы определенного знака.

Спектры импеданса “чистого” и допированного жидкого кристалла МББА измерялись в плоскопараллельных ячейках с электродами, покрытых тонкой полимерной пленкой полиимида. Допирование

ЖК проводилось из раствора комплекса краун-эфира с неорганической солью NaCl (1:1) в хлороформе и этаноле. Концентрация краун-эфира (дибензо-18-краун-6 эфир) составляла 2 wt.%. Измерения спектров импеданса проводились с использованием потенциостата-измерителя импеданса Autolab (Metrohm B.V. Netherlands) по двухэлектродной схеме при напряжении 25 мВ в частотном диапазоне  $10^{-3}$ - $10^5$  Гц. Анализ спектров основывался на модели электродной поляризации. Сравнение результатов анализа чистого и допированного комплексом краун-эфира с NaCl жидкого кристалла позволило оценить концентрацию и коэффициенты диффузии положительных и отрицательных ионов.

Список публикаций:

[1] Лебедев Ю. А., Чувывров А. Н // Кристаллография. Москва. Изд-во Академия наук СССР. 1983. № 2. С.538.

## Изучение фотопроводимости пленок полидифениленфталида

**Рахматова Лилия Илфатовна**

**Юсупов Азат Равилевич, Киан Амин**

*Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы*

*Лачинов Алексей Николаевич, д.ф.-м.н.*

*[rahmatova.liliya@mail.ru](mailto:rahmatova.liliya@mail.ru)*

Ранее было выявлено, что в пленках полидифениленфталида (ПДФ) наблюдается длительное послесвечение, которое объясняется в рамках представлений о электронных состояниях в запрещенной зоне полимера, которые могут участвовать в излучательной рекомбинации и процессе транспорта зарядов [1].

В данной работе проведены измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ) тонких пленок ПДФ при воздействии УФ-излучения (рис.1). Образцы представляли собой структуру полупроводник-диэлектрик-металл - ИТО/ПДФ/Al, за основу была взята стеклянная подложка со слоем ИТО. Диэлектрическая полимерная пленка наносилась методом центрифугирования, толщина которой контролировалась микроинтерферометром и составляла порядка ~150 нм. Металлический электрод формировался термодиффузионным напылением в вакууме.

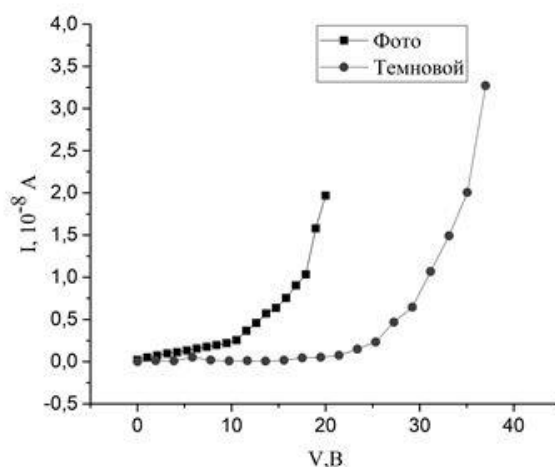


рис. 1. Экспериментальные вольт-амперные характеристики

Проведены оценки таких параметров, как подвижность носителей заряда и высота барьера по формулам (1) и (2):

$$\varphi = \frac{kT}{q} \ln \left( \frac{T^2 A}{j} \right) \quad (1)$$

где  $k$ - постоянная Больцмана,  $T$ - температура на образце,  $q$ -заряд электрона,  $j$ -плотность тока,  $A$  - постоянная Ричардсона

$$\mu = \frac{j \cdot L^3}{4,4 \cdot 10^{-14} \cdot \varepsilon \cdot U^2} \quad (2)$$

где  $j$ -плотность тока,  $L$ - толщина пленки,  $\varepsilon$  - диэлектрической проницаемость,  $U$ - напряжение в образце.

За прямое включение приняты измерения, когда положительный потенциал на ИТО и обратное включение – при положительном потенциале на Al. Результаты приведены в таблице: